Proyecto Final AA

Samuel Cardenete Rodríguez y Juan José Sierra González

2 de junio de 2017

Introducción:

Para la realización de esta práctica obtendremos el ajuste de un modelo lineal y de varios no lineales enfrentándonos a un problema de regresión "Housing Data Set", obtenido del repositorio de la UCI.

"Housing Data Set"

En este caso nos encontramos frente a un problema de regresión, tal y como hemos visto anteriormente. Se trata de un conjunto de datos que estima el valor de distintas viviendas en los suburbios de Boston, basándose en algunas características como el crimen per capita, la accesibilidad a autopistas radiales, etc.

Como primer paso para abordar el problema, leeremos los datos y los dividiremos seleccionando nuestro conjunto de entrenamiento y de prueba.

Lectura de datos:

Procedemos a la lectura de la base de datos de regresión 'Housing'.

```
datos_housing = as.data.frame( read_csv("datos/housing.data"))
```

```
## Parsed with column specification:
## cols(
##   CRIM = col_double(),
##   ZN = col_double(),
##   INDUS = col_double(),
##   CHAS = col_integer(),
##   NOX = col_double(),
##   RM = col_double(),
##   AGE = col_double(),
##   DIS = col_double(),
##   RAD = col_integer(),
##   TAX = col_double(),
##   PTRATIO = col_double(),
##   B = col_double(),
##   LSTAT = col_double(),
##   MEDV = col_double()
## )
```

```
head(datos_housing)
```

```
##      CRIM ZN INDUS CHAS   NOX    RM  AGE    DIS RAD TAX PTRATIO      B
## 1 0.00632 18  2.31    0 0.538 6.575 65.2 4.0900   1 296    15.3 396.90
## 2 0.02731  0  7.07    0 0.469 6.421 78.9 4.9671   2 242    17.8 396.90
## 3 0.02729  0  7.07    0 0.469 7.185 61.1 4.9671   2 242    17.8 392.83
## 4 0.03237  0  2.18    0 0.458 6.998 45.8 6.0622   3 222    18.7 394.63
## 5 0.06905  0  2.18    0 0.458 7.147 54.2 6.0622   3 222    18.7 396.90
## 6 0.02985  0  2.18    0 0.458 6.430 58.7 6.0622   3 222    18.7 394.12
##   LSTAT MEDV
## 1  4.98 24.0
## 2  9.14 21.6
## 3  4.03 34.7
## 4  2.94 33.4
## 5  5.33 36.2
```

```
## 6  5.21 28.7
```

Conjuntos de training y test usados

A continuación, realizaremos el particionamiento del conjunto de datos. Para el conjunto 'train' de entrenamiento emplearemos el 80% del conjunto total de los datos, de forma que el 20% restante será empleado para test. Hemos decidido utilizar este porcentaje dado que se nos ha explicado que un buen reparto entre train y test oscila entre dos terceras partes para train, o bien hasta un 80%, utilizando el resto para test.

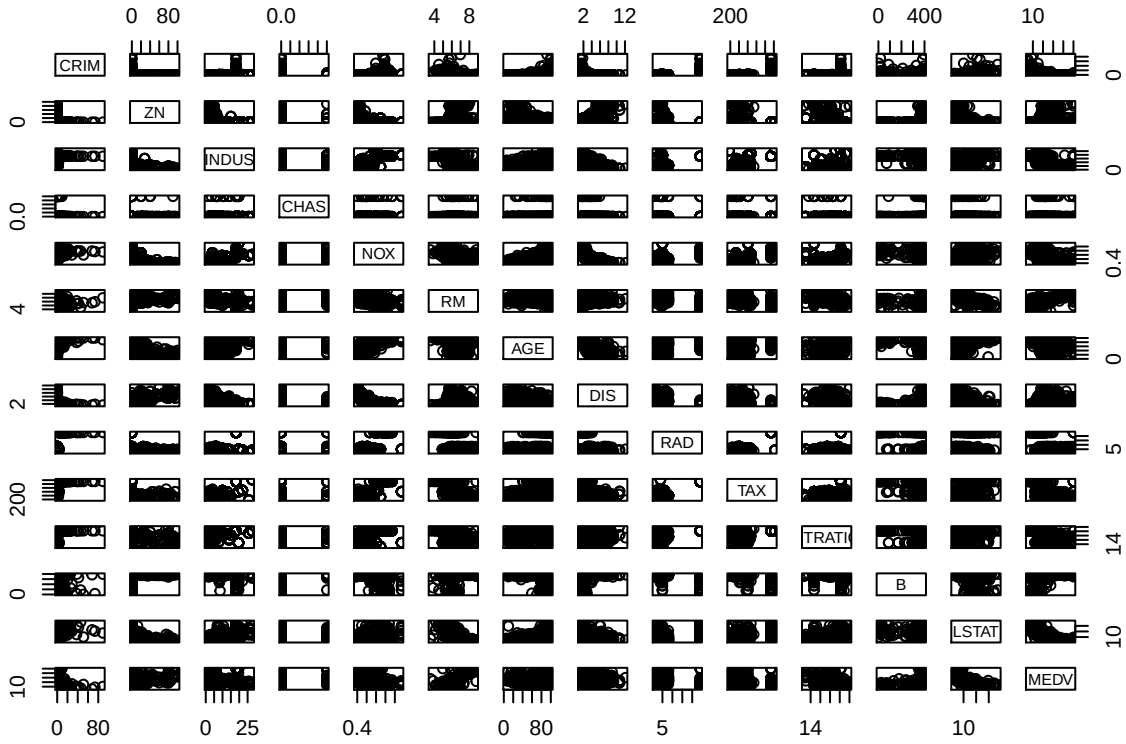
Procedemos al particionamiento de los datos, así como a su almacenamiento en respectivas variables:

```
train = sample (nrow(datos_housing), round(nrow(datos_housing)*0.8))
#definimos ambos conjuntos en dos data.frame diferentes:
housing_train = datos_housing[train,]
housing_test = datos_housing[-train,]
```

Preprocesamiento de los datos

Antes de entrar en el preprocesamiento, consideramos interesante realizar una vista preliminar de las gráficas de dispersión de cada atributo de la base de datos siendo reflejado con todos los demás. Así obtenemos una matriz simétrica de gráficas:

```
pairs(datos_housing)
```



Al representar la matriz de diagramas podemos hacernos una primera idea de la dispersión de los datos. Como podemos observar esta dispersión es alta, pero la columna que más nos interesa sobre todo es la de la variable respuesta, 'MEDV'. En este caso podemos observar que la variable 'LSTAT' parece presentar una fuerte representatividad con respecto a la variable respuesta, la podemos marcar a priori como una a tener en cuenta a la hora de realizar modelos.

En este caso, estamos trabajando sobre un conjunto de datos que posee 14 atributos, para realizar una

reducción de datos debemos de estar seguros de que existen atributos redundantes para el aprendizaje de nuestros modelos.

A primera vista la variabilidad de los datos es alta, no parece haber ningún atributo redundante, veamos entonces si es aconsejable realizar una reducción de la dimensionalidad de los datos mediante la aplicación de PCA (Computing the Principal Components) sobre el conjunto de datos. Estos atributos redundantes podrían ser recombinados en nuevas características como combinaciones lineales de ellos.

PCA calcula la varianza de cada atributo respecto a los demás, de forma que aquellos atributos que posean menor varianza (cercana a cero) con respecto a los demás serán considerados como redundantes.

Además, para no arriesgar mucho (puesto que PCA trabaja "a ciegas") representaremos sólo aquellos componentes que expliquen hasta el 90% de la variabilidad de los datos (es necesario que los datos estén escalados y centrados para aplicar PCA):

```
housingTrans = preProcess(datos_housing[,-which(names(datos_housing) == "MEDV")], method = c("BoxCox", "
housingTrans$rotation
```

```
##                 PC1          PC2         PC3         PC4          PC5
## CRIM     0.351358922 -0.080323795  0.21229244 -0.03046747  0.033900319
## ZN      -0.255408294  0.026705781  0.40186216 -0.13992202 -0.300421126
## INDUS    0.337559710 -0.035840397 -0.09365446 -0.03972878  0.033764630
## CHAS     0.008802168 -0.567171494 -0.23494015 -0.75574795 -0.160554801
## NOX      0.345753987 -0.204606754 -0.08234027  0.18010421 -0.014959856
## RM      -0.183045703 -0.509627274  0.33596340  0.25887613  0.403709095
## AGE      0.307325638 -0.196513392 -0.22455474  0.24264930  0.001885428
## DIS     -0.326395109  0.246224763  0.13552775 -0.22911923 -0.020886542
## RAD      0.294095534 -0.032632643  0.42351142 -0.20415425  0.178466288
## TAX      0.305780705  0.035027906  0.38197798 -0.16442219  0.059603078
## PTRATIO  0.197381672  0.426164494  0.02183027 -0.33884117  0.523471973
## B       -0.195668297  0.002287144 -0.41362881 -0.10328662  0.556939871
## LSTAT    0.293283963  0.291762870 -0.21021966 -0.04167087 -0.313731923
##                 PC6           PC7
## CRIM    -0.08661682  0.1034686268
## ZN      -0.42440659 -0.5480987095
## INDUS   -0.01982528  0.1706661615
## CHAS     0.12777740 -0.0629487572
## NOX     -0.09608618  0.0004566907
## RM       0.22368487 -0.2592036155
## AGE     -0.03726619 -0.5444595484
## DIS      0.09479850  0.0624644483
## RAD     -0.17887309  0.2017656634
## TAX     -0.29408743  0.0408997952
## PTRATIO  0.39295495 -0.3966467824
## B       -0.66903319 -0.0022056976
## LSTAT   -0.07423922 -0.2975770855
```

Como podemos observar en la tabla, se han reducido los atributos a 7 atributos (combinaciones lineales de los 14 anteriores). Pero si observamos las varianzas de cada atributo en la tabla respecto al resto de atributos, vemos que no existe ningun atributo cuyas varianzas sean cercanas todas a 0. Aún así, para asegurarnos lo comprobamos mediante la siguiente función:

```
nearZeroVar(housingTrans$rotation)
```

```
## integer(0)
```

Como comprobamos con la función nearZeroVar no existe ningun atributo cuyas varianzas respecto a las demás sean todas cercanas a 0, y por tanto todos los atributos son considerados representativos, pues poseen

dispersión. En conclusión, no realizaremos ninguna reducción de atributos.

Para conlcuir el preprocesamiento de los datos, realizaremos las siguientes operaciones sobre ellos:

- **Escalado**: Se trata de dividir cada uno de los atributos por su desviación típica.
- **Centrado**: Calculamos la media de cada atributo y se la restamos para cada valor.
- **Box-Cox**: Se trata de intentar reducir el sesgo de cada atributo, para intentar hacer este más próximo a una distribución Gaussiana.

Para aplicar las transformaciones, emplearemos la función preProcess sobre nuestro conjunto train, de forma que realizando un predict sobre el objeto transformación obtenido, obtengamos el conjunto de datos train preprocesado. A continuación, realizaremos **las mismas transformaciones** sobre el conjunto de test, utilizando el mismo objeto transformación:

```
housingTrans = preProcess(housing_train[,-which(names(housing_train) == "MEDV")],
                          method = c("BoxCox", "center", "scale"),thresh = 0.9)

housing_train[,-which(names(housing_train) == "MEDV")]=predict(housingTrans,
         housing_train[,-which(names(housing_train) == "MEDV")])

housing_test[,-which(names(housing_test) == "MEDV")] =predict(housingTrans,housing_test[,-which(names(h
```

Estimación de parámetros

Antes de realizar un modelo, veamos cuáles son las características más representativas (las que ofrecen varianza mayor con respecto al resto de datos), de forma que no empecemos a realizar modelos a ciegas, sino fijándonos en la calidad de sus atributos.

Para ello emplearemos la función regsubsets. Esta función realiza una búsqueda exhaustiva (empleando Branch&Bound) de las mejores agrupaciones de atributos en nuestro conjunto de entrenamiento para predecir en una regresión lineal (será el primer modelo a realizar):

```
regsub_housing =regsubsets(datos_housing[,-which(names(datos_housing) == "MEDV")],
                           datos_housing[,which(names(datos_housing) == "MEDV")])

summary(regsub_housing)
```

```
## Subset selection object
## 13 Variables  (and intercept)
##         Forced in Forced out
## CRIM        FALSE      FALSE
## ZN          FALSE      FALSE
## INDUS       FALSE      FALSE
## CHAS        FALSE      FALSE
## NOX         FALSE      FALSE
## RM          FALSE      FALSE
## AGE         FALSE      FALSE
## DIS         FALSE      FALSE
## RAD         FALSE      FALSE
## TAX         FALSE      FALSE
## PTRATIO     FALSE      FALSE
## B           FALSE      FALSE
## LSTAT       FALSE      FALSE
## 1 subsets of each size up to 8
## Selection Algorithm: exhaustive
##          CRIM ZN  INDUS CHAS NOX RM  AGE DIS RAD TAX PTRATIO B   LSTAT
```

```
## 1  ( 1 ) " "  " " " " "   " "  " " " " " " " " " " " " " " " " " "     " " "*"
## 2  ( 1 ) " "  " " " " "   " "  " " "*" " " " " " " " " " " " " "     " " "*"
## 3  ( 1 ) " "  " " " " "   " "  " " "*" " " " " " " " " " " " "*"     " " "*"
## 4  ( 1 ) " "  " " " " "   " "  " " "*" " " "*" " " " " " " "*"     " " "*"
## 5  ( 1 ) " "  " " " " "   " "  "*" "*" " " "*" " " " " " " "*"     " " "*"
## 6  ( 1 ) " "  " " " " "   "*"  "*" "*" " " "*" " " " " " " "*"     " " "*"
## 7  ( 1 ) " "  " " " " "   "*"  "*" "*" " " "*" " " " " " " "*"     "*" "*"
## 8  ( 1 ) " "  "*" " " "   "*"  "*" "*" " " "*" " " " " " " "*"     "*" "*"
```

En la gráfica aportada por la función, obtenemos los atributos más representativos en caso de realizar un modelo con 'n' parámetros (filas), de forma que según el número de atributos que deseemos para nuestro modelo nos estíma cuales serían los parámetros más representativos a emplear. Nuestro criterio a seguir a la hora de generar modelos lineales será tratar de predecir utilizando las agrupaciones de atributos que la función considera representativos, es decir, si queremos realizar un modelo con n características, utilizaremos aquellas que estén marcadas con una estrella para la fila n. Para mostrar un ejemplo que explique la gráfica, si queremos utilizar 3 atributos para el modelo, escogeremos 'LSTAT', 'RM' y 'PTRATIO'.

Ahora que sabemos cómo elegir las características más recomendables para realizar modelos, podremos construir una serie de modelos lineales con algunas de estas características y validar con el conjunto de test para comprobar los errores que reflejan. Luego compararemos los resultados del mejor modelo obtenido con el resto de modelos no lineales que son objeto de estudio del proyecto.

Regularización

Antes de generar cualquier modelo también es importante realizar un análisis para ver si es interesante aplicar una regularización empleando Weight-decay mediante la función glmnet. Dicha función recibe los siguientes hiperparámetros:

- **Alpha**: Para aplicar el weight-decay utilizaremos dicho argumento con valor 0.
- **Lambda**: Parámetro de regularización. (Multiplica la matriz de identidad)

Hace falta tener en cuenta antes la correcta elección del lambda, de forma que escojamos el que mejores resultados nos pueda arrojar. En lugar de seleccionarlo de forma arbitraria, será mejor emplear validación cruzada:

```
etiquetas = housing_train[,which(names(housing_train) == "MEDV")]
tr = housing_train[,-which(names(housing_train) == "MEDV")]
tr = as.matrix(tr)
crossvalidation =cv.glmnet(tr,etiquetas,alpha=0)
print(crossvalidation$lambda.min)
```

```
## [1] 0.7884988
```

Una vez obtenido el lambda que proporciona un menor E_{out}, procedemos a generar un modelo de regularización, en primer lugar empleando el valor de lambda generado por validación cruzada, y en segundo lugar empleando un lambda igual a cero, de forma que no apliquemos regularización. El objetivo será comprobar si los parámetros obtenidos son significativamente diferentes como para que merezca la pena realizar regularización en nuestros modelos.

```
modelo_reg = glmnet(tr,etiquetas,alpha=0,lambda=crossvalidation$lambda.min)
print(modelo_reg)
```

```
##
## Call:  glmnet(x = tr, y = etiquetas, alpha = 0, lambda = crossvalidation$lambda.min)
##
##      Df   %Dev Lambda
## [1,] 13 0.7692 0.7885
```

Aplicando regularización con el lambda obtenido tras la validación cruzada obtenemos una desviación del 0.769. Probemos ahora no aplizando regularización, empleando un hiperparámetro lambda de 0, y comprobemos su desviación:

```
modelo_reg = glmnet(tr,etiquetas,alpha=0,lambda=0)
print(modelo_reg)
```

```
##
## Call:  glmnet(x = tr, y = etiquetas, alpha = 0, lambda = 0)
##
##      Df   %Dev Lambda
## [1,] 13 0.7779      0
```

Como podemos comprobar, las desviaciones obtenidas empleando o no regularización mediante weight-decay son similares (0.769 frente a 0.778), por tanto, comcluimos en que emplear regularización no merece la pena.

Definición de modelos lineales

Para la realización de los modelos planteamos emplear regresión logística mediante la función 'glm'; pero si empleamos regresión logística obtendremos un conjunto de probabilidades que predigan los valores. Para ello, como precondición sería necesario normalizar los valores de la variable respuesta de forma que se encontraran en el intervalo [0,1].

Entonces procederemos a generar modelos mediante regresión lineal, así obtendremos un valor dependiendo de la distancia de los atributos a la recta generada.

```
m_muestra_housing = lm(MEDV ~ LSTAT, data=housing_train)
```

Antes definimos una función para el cálculo del error. Para ello realizamos un cálculo de la media de errores cuadráticos. Utilizamos la función *mse*, a la que llamamos una vez que se han calculado las probabilidades en base a un modelo.

Sean Y las etiquetas verdaderas e Y' las predichas por nuestro modelo:

$$ECM = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i' - Y_i)^2$$

```
calculoMSE  = function (modelo, test, variable_respuesta){
  prob_test = predict(modelo, test[,-which(names(test) == variable_respuesta)])

  mse(test[,which(names(test) == variable_respuesta)], prob_test)
}
```

Utilizamos nuestra función para calcular el error del modelo de muestra generado anteriormente:

```
etest_mmuestra = calculoMSE(m_muestra_housing, housing_test, "MEDV")
etest_mmuestra
```

```
## [1] 24.58877
```

Obtenemos un error de 24.59, pero se trata de un modelo excesivamente simple como para reflejar buenos resultados en un problema real. Por tanto busquemos un modelo diferente empleando otra carasterística, la siguiente más representativa en el conjunto de datos:

```
m1_housing = lm(MEDV ~ LSTAT + RM, data=housing_train)

etest_m1 = calculoMSE(m1_housing, housing_test, "MEDV")
etest_m1
```

```
## [1] 25.34943
```

Utilizando dos características el error en el conjunto de test aumenta. No podemos asegurar que se haya producido sobreajuste para tan solo dos características, así que seguimos probando nuevos modelos, añadiendo la siguiente característica recomendada por regsubsets:

```
m2_housing = lm(MEDV ~ LSTAT + RM + PTRATIO, data=housing_train)

etest_m2 = calculoMSE(m2_housing, housing_test, "MEDV")
etest_m2
```

```
## [1] 23.62471
```

El error ya sí ha descendido, por lo que nos vemos capacitados de seguir probando con nuevas características. Como aún nos queda una buena cantidad por probar, añadimos una más al siguiente modelo:

```
m3_housing = lm(MEDV ~ LSTAT + RM + PTRATIO + DIS, data=housing_train)

etest_m3 = calculoMSE(m3_housing, housing_test, "MEDV")
etest_m3
```

```
## [1] 19.90819
```

En esta ocasión tenemos un error de 19.908, que mejora sustancialmente al que teníamos antes. Probemos con la siguiente característica:

```
m4_housing = lm(MEDV ~ LSTAT + RM + PTRATIO + DIS + NOX, data=housing_train)

etest_m4 = calculoMSE(m4_housing, housing_test, "MEDV")
etest_m4
```

```
## [1] 20.24523
```

En este momento ya se produce sobreajuste, por lo que pasamos a probar con transformaciones no lineales sobre las características que han presentado el mejor modelo hasta ahora:

```
m5_housing = lm(MEDV ~ LSTAT + RM + I(PTRATIO^2) + DIS, data=housing_train)

etest_m5 = calculoMSE(m5_housing, housing_test, "MEDV")
etest_m5
```

```
## [1] 20.28286
```

Hemos probado a realizar una transformación cuadrática sobre uno de los atributos, y el error no ha reducido. La última transformación que probaremos será multiplicar las componentes del modelo entre sí:

```
m6_housing = lm( MEDV ~ LSTAT * RM * PTRATIO * DIS, data=housing_train)

etest_m6 = calculoMSE(m6_housing, housing_test, "MEDV")
etest_m6
```

```
## [1] 11.10787
```

Con este modelo lineal con transformaciones no lineales hemos alcanzado un error de 11.108, mejor que los anteriores. Por tanto, nos quedamos con este modelo como el mejor lineal. ¿Es este mejor que un modelo no lineal? A continuación probaremos distintos modelos no lineales y compararemos los resultados para ver cuál ajusta mejor.

MODELOS NO LINEALES:

Definiremos cuatro modelos no lineales con los que comparar el mejor modelo lineal que hemos encontrado y poder realizar una valoración objetiva de cuál ofrece mejores resultados para nuestra base de datos. Los modelos a estudiar serán:

- **Redes Neuronales**
- **Support Vector Machine**
- **Boosting**
- **Random Forest**

REDES NEURONALES:

Comenzaremos abordando las redes neuronales.

Para realizar modelos de redes neuronales utilizaremos el paquete "neuralnet", que nos aporta una función para el estudio de estos modelos.

```
crossValidationNN = function(datos, capas){
  maxs = apply(datos, 2, max)
  mins = apply(datos, 2, min)
  datos = as.data.frame(scale(datos, center = mins, scale = maxs - mins))
  set.seed(6)
  #realizamos 5 particiones:
  folds = split(datos, sample(rep(1:5, nrow(datos)/5)))
  errores = as.numeric()
  for (i in 1:5){
    test_ = folds[[i]]
    train_ = data.frame()
    for (j in 1:5){
      if(j!=i)
        train_ = rbind(train_, folds[[j]])
    }

    n = names(train_)
    f = as.formula(paste("MEDV ~", paste(n[!n %in% "MEDV"], collapse = " + ")))
    nn = neuralnet(f,data=train_,hidden=capas,linear.output=T)

    pr.nn = compute(nn,test_[,1:13])

    pr.nn_ = pr.nn$net.result*(max(datos_housing$MEDV)-min(datos_housing$MEDV))+min(datos_housing$MEDV)
    test.r = (test_$MEDV)*(max(datos_housing$MEDV)-min(datos_housing$MEDV))+min(datos_housing$MEDV)

    MSE.nn = sum((test.r - pr.nn_)^2)/nrow(test_)

    errores = c(errores, MSE.nn)

  }

  mean(errores)
}

eout_nn_1_5=crossValidationNN(datos_housing,5)
```

```
## Warning in split.default(x = seq_len(nrow(x)), f = f, drop = drop, ...):
```

```
## largo de datos no es múltiplo de la variable de separación
```

```
eout_nn_1_5
```

```
## [1] 17.53102175
```

```
eout_nn_1_3=crossValidationNN(datos_housing,3)
```

```
## Warning in split.default(x = seq_len(nrow(x)), f = f, drop = drop, ...):
## largo de datos no es múltiplo de la variable de separación
```

```
eout_nn_1_3
```

```
## [1] 22.21987699
```

```
eout_nn_2_53=crossValidationNN(datos_housing,c(5,3))
```

```
## Warning in split.default(x = seq_len(nrow(x)), f = f, drop = drop, ...):
## largo de datos no es múltiplo de la variable de separación
```

```
eout_nn_2_53
```

```
## [1] 12.63083018
```

```
eout_nn_2_74=crossValidationNN(datos_housing,c(7,4))
```

```
## Warning in split.default(x = seq_len(nrow(x)), f = f, drop = drop, ...):
## largo de datos no es múltiplo de la variable de separación
```

```
eout_nn_2_74
```

```
## [1] 16.35025809
```

```
eout_nn_3_853=crossValidationNN(datos_housing,c(8,5,3))
```

```
## Warning in split.default(x = seq_len(nrow(x)), f = f, drop = drop, ...):
## largo de datos no es múltiplo de la variable de separación
```

```
eout_nn_3_853
```

```
## [1] 12.55428639
```

```
eout_nn_3_742=crossValidationNN(datos_housing,c(7,4,2))
```

```
## Warning in split.default(x = seq_len(nrow(x)), f = f, drop = drop, ...):
## largo de datos no es múltiplo de la variable de separación
```

```
eout_nn_3_742
```

```
## [1] 11.30877295
```

```
maxs = apply(datos_housing, 2, max)
mins = apply(datos_housing, 2, min)
datos_escalados = as.data.frame(scale(datos_housing, center = mins, scale = maxs - mins))
housing_train_esc = datos_escalados[train,]
n = names(housing_train_esc)
f = as.formula(paste("MEDV ~", paste(n[!n %in% "MEDV"], collapse = " + ")))
nn_winner = neuralnet(f,data=housing_train_esc,hidden=c(7,4,2),linear.output=T)
plot(nn_winner)
```

SUPPORT VECTOR MACHINE

Trataremos de ajustar los parámetros para encontrar el mejor valor para cada uno y dar así con un modelo mejor.

```
tune_gamma_svm = tune(svm, MEDV ~ ., data=housing_train, ranges = list(gamma=seq(0,1,0.01)), cost = 2^(1
tune_gamma_svm
```

```
##
## Parameter tuning of 'svm':
##
## - sampling method: 10-fold cross validation
##
## - best parameters:
##  gamma
##   0.09
##
## - best performance: 12.10028428
```

```
svm_housing = svm(MEDV ~ ., data=housing_train, kernel="radial", gamma=0.09)

pred_svm = predict(svm_housing, housing_test)

mse(housing_test$MEDV, pred_svm)
```

```
## [1] 15.21208469
```

BOOSTING

A continuación pasamos a valorar el modelo de Boosting. Como hemos aprendido, Boosting es un método muy potente que basa su clasificador final en una serie de clasificadores simples previos. El final será una combinación de los anteriores que separe de forma correcta o próxima los datos.

Antes de generar el modelo, vamos a realizar una estimación (tuning) de los parámetros más interesantes a nuestro parecer para Boosting. Estos son:

- **n.trees**: el número de árbol generados, el cual estimaremos entre 50 y 500.
- **interaction.depth**: la profundidad de cada árbol, es decir, su complejidad. La estimamos entre 2 y 10.
- **shrinkage**: la tasa de aprendizaje, la cual vamos a estimar entre 0.01 y 0.1, que son dos valores de tasa de aprendizaje que hemos utilizado en prácticas anteriores, para ver cuál se ajusta más a nuestro problema.

Vamos a realizar una rejilla de valores que deben tomar los distintos parámetros para cada una de las ejecuciones, de forma que se pueda estimar la mejor. La construiremos utilizando la función expand.grid, añadiendo como columnas los nombres de los atributos y como filas las combinaciones de valores a tomar. Además, hemos tenido que añadir una columna con los valores de n.minobsinnode porque lo requería la función. En este caso vamos a dejarle el valor que toma por defecto según la documentación de gbm, que es 10.

Nuestra rejilla tendrá entonces 50 combinaciones, aquellas posibles entre los 10 valores diferentes que tomará n.trees y los 5 que tomará interaction.depth.

Para llevar a cabo cada una de las experimentaciones con los modelos, utilizaremos la técnica de Bagging, generando conjuntos mediante Bootstrap con los que poder validar cada modelo un número considerable de veces y obtener un valor de error significativo que nos permita determinar con certeza el valor idóneo de los parámetros (aquellos valores que presenta el mejor modelo generado).

El número de conjuntos generados con Bootstrap será indicado en el objeto bootstrap_control, generado mediante la función trainControl y a la que le pasamos el número de conjuntos a ser empleados. La técnica

con la que se seleccionarán estos conjuntos se especificará a continuación en la función train, del paquete "caret".

En la llamada a esta función se pueden especificar multitud de parámetros, pero los que nostros vamos a especificar son los datos y la variable respuesta, lógicamente, y además el tipo de modelo a entrenar (gbm = Boosting), el número de conjuntos a generar por Bootstrapping (con nuestro objeto bootstrap_control), indicando el método especificando que la variable bag.fraction sea 1 (cada uno de los conjuntos se generan de igual tamaño al conjunto de datos, con reemplazamiento), y por último, la rejilla que contiene los parámetros a estimar, que es el grid que hemos creado anteriormente.

```
grid_gbm = expand.grid(.interaction.depth = (1:5)*2, .n.trees = (1:10)*50, .shrinkage = 0.1, .n.minobsi

bootstrap_control = trainControl(number = 200)
gbm_housing = train(housing_train[,1:13], housing_train[,14], method="gbm", trControl = bootstrap_contr
gbm_housing$bestTune
```

```
##    n.trees interaction.depth shrinkage n.minobsinnode
## 25     250                 6       0.1             10
```

Una vez hemos terminado de estimar los parámetros, podemos acceder a la mejor combinación utilizando la componente bestTune del objeto construido. Vemos que nuestra mejor estimación supone utilizar 350 árboles con una profundidad de 4.

Ahora procedamos a validar dicho modelo empleando 5fold cross-validation con los parámetros obtenidos. Analizaremos el error medio cuadrático obtenido (E_out)

```
set.seed(7)
boosting_housing = gbm(MEDV ~ ., data = housing_train, n.trees = 250, interaction.depth = 6, shrinkage =
```

```
## Distribution not specified, assuming gaussian ...
```

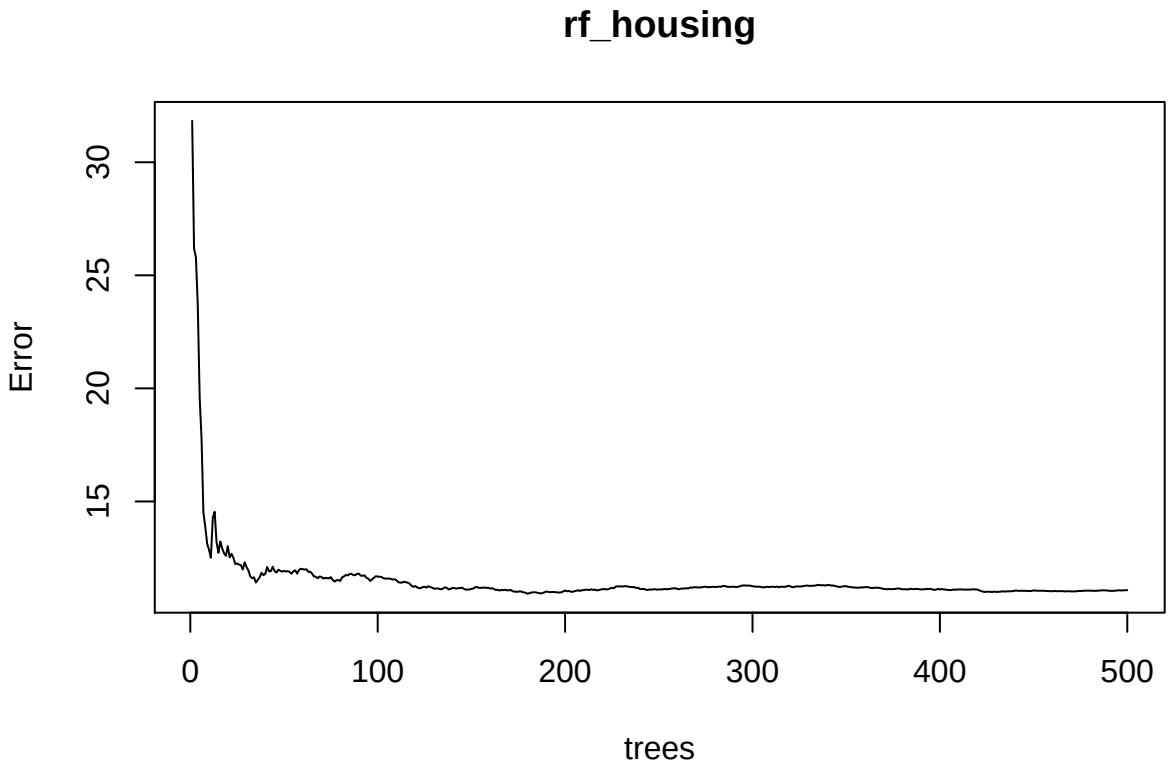
```
pred_boosting = predict(boosting_housing, housing_test, n.trees = 250, interaction.depth = 6, shrinkage

mse(housing_test$MEDV, pred_boosting)
```

```
## [1] 6.795119429
```

```
m = ncol(housing_train)/3
set.seed(6)
rf_housing = randomForest(MEDV ~ ., housing_train, ntree=500, mtry=m)
print(rf_housing)
```

```
##
## Call:
##  randomForest(formula = MEDV ~ ., data = housing_train, ntree = 500,      mtry = m)
##                Type of random forest: regression
##                      Number of trees: 500
## No. of variables tried at each split: 5
##
##           Mean of squared residuals: 11.07499434
##                     % Var explained: 86.59
```

```r
plot(rf_housing)
```



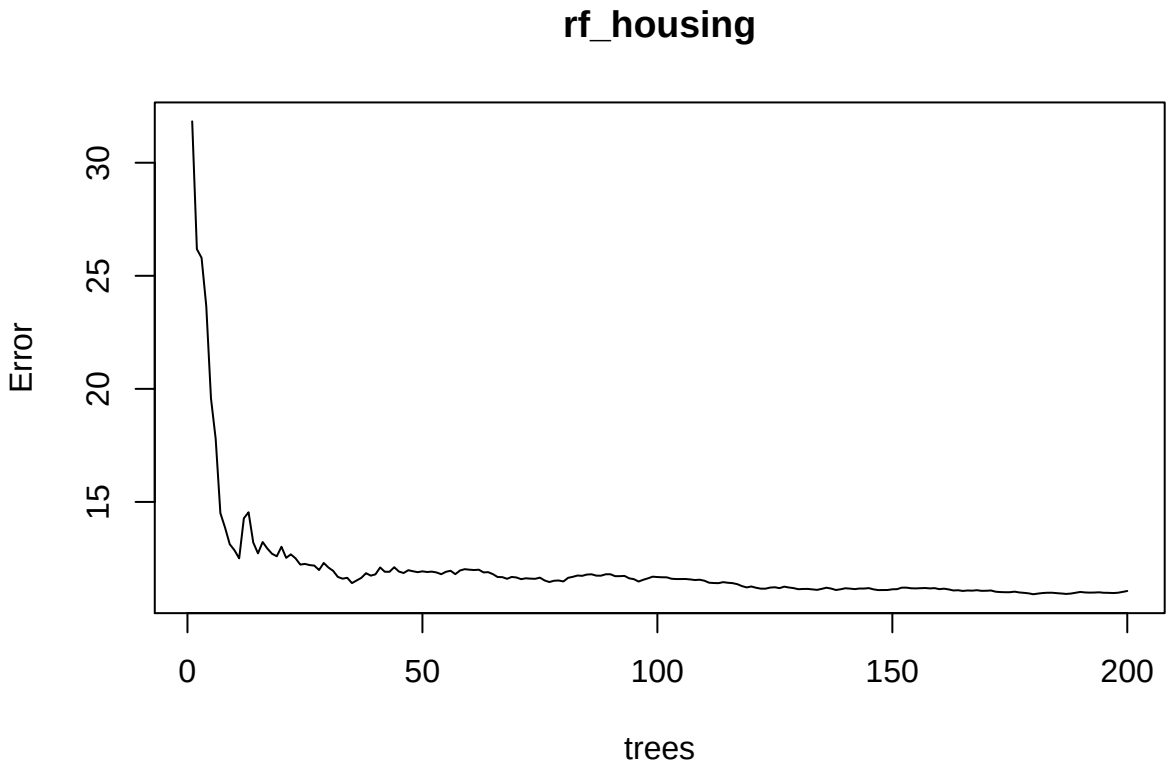

```r
m = ncol(housing_train)/3
set.seed(6)
rf_housing = randomForest(MEDV ~ ., housing_train, ntree=200, mtry=m)
calculoMSE(rf_housing, housing_test, "MEDV")
```

```
## [1] 8.045940848
```

```r
print(rf_housing)
```

```
##
## Call:
##  randomForest(formula = MEDV ~ ., data = housing_train, ntree = 200,      mtry = m)
##                Type of random forest: regression
##                      Number of trees: 200
## No. of variables tried at each split: 5
##
##           Mean of squared residuals: 11.06119412
##                     % Var explained: 86.6
```

```r
plot(rf_housing)
```



El error no es malo pero sigue siendo un peor modelo que el mejor que hemos generado ahora mismo. Hemos comprobado también que es contraproducente realizar transformaciones con logaritmos y raíces debido a la cantidad de datos negativos que tiene la base de datos una vez normalizada.

En resumen, tras realizar distintas combinaciones de atributos y tratar de predecir con ellos, utilizando alguna transformación no lineal, experimentalmente hemos reducido el error fuera de la muestra a un 0.239. Este error se ha obtenido con un modelo con transformación cuadrática sobre el atributo 'age' (el que mejor representa la muestra como hemos visto en regSubsets) y utilizando los 4 siguientes mejores atributos.

Estimacion del error E_{out}

Una vez que hemos comprobado qué modelo nos aporta un mejor resultado, vamos a proceder a realizar una estimación del E_{out} de forma que obtengamos un valor más representativo que un error puntual en un par de conjuntos train-test.

Para ello vamos a realizar un experimento repitiendo el proceso completo, desde la generación de particiones, tanto train como test, con la misma proporción realizada anteriormente (0.8 para train y 0.2 para test), hasta la definición de los modelos y cálculo del E_{test}. Repetiremos el proceso 100 veces y obtendremos la media de los E_{test}, considerándolo una buena estimación del E_{out} para el modelo.

Definamos una función que realice tanto la generación y el particionado, así como las transformaciones sobre los conjuntos de datos y que devuelva el error generado por el mejor modelo obtenido:

```
generarErrorParticionhousing = function(datos){
  #Si queremos obtener un conjunto de indices train para luego ejecutar un modelo lineal sobre el train
  indices_train = sample (nrow(datos), round(nrow(datos)*0.7))
  #definimos ambos conjuntos en dos data.frame diferentes:
  housing_train = datos[indices_train,]
  housing_test = datos[-indices_train,]

  #TRANSFORMACIONES:
```

```
  housingTrans = preProcess(housing_train[,-which(names(datos_housing) == "MEDV")], method = c("BoxCox"
housing_train[,-which(names(housing_train) == "MEDV")] =predict(housingTrans,housing_train[,-which(name
housing_test[,-which(names(housing_test) == "MEDV")] =predict(housingTrans,housing_test[,-which(names(h

#EVALUACION DEL MODELO
modelo_housing = lm(MEDV ~ LSTAT* RM* PTRATIO * DIS, data=housing_train)

etest = calculoMSE(modelo_housing, housing_test, "MEDV")
etest
}

mean(replicate(100, generarErrorParticionhousing(datos_housing)))
```

```
## [1] 14.52424782
```

Como podemos ver, obtenemos una estimación del E_{out} de 0.286. Este error representa mejor el error real obtenido por nuestro modelo de regresión lineal, aunque sea peor que el error puntual que teníamos antes. Seguramente esto se deba a que para los conjuntos train y test definidos anteriormente el modelo se ajustaba particularmente bien, mientras que de forma general en el problema ese modelo no llega a ser tan bueno.

Conclusión y modelo final seleccionado